

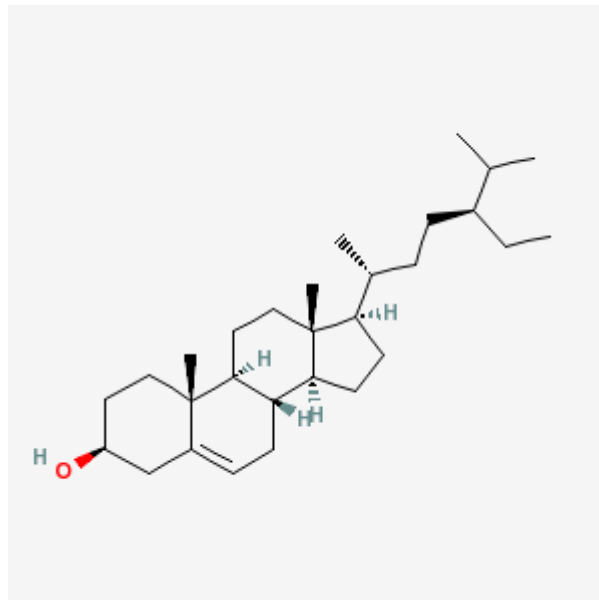
Stoffdatenblatt

β -Sitosterol

(83-46-5)

Stand: 15.03.2010

Erstellt von: AL-Luhnstedt



1 Substanz

Name:	β -Sitosterol
EG-Name:	Stigmast-5-en-3- β -ol
IUPAC-Name:	(3S,8S,9S,10R,13R,14S,17R)-17-[(2R,5R)-5-Ethyl-6-methylheptan-2-yl]-10,13-dimethyl-2,3,4,7,8,9,11,12,14,15,16,17-dodecahydro-1H-cyclopenta[a]phenanthren-3-ol
CAS-Nummer:	83-46-5
EG-Nummer:	201-480-6
ETOX-Nummer:	89271
Molgewicht:	414,71 g/mol
EG Richtlinie 67/548/EWG Annex I Index:	---
Summenformel:	C ₂₉ H ₅₀ O
Stoffgruppe:	Steroide

2 Vorschlag für eine Umweltqualitätsnorm

2.1 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	JD-UQN	ZHK-UQN	Anmerkung
Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen)	---	---	Unzureichende Datenbasis (siehe 8.1)
Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer)	---	---	Unzureichende Datenbasis (siehe 8.1)

JD: Jahresdurchschnitt; ZHK: zulässige Höchstkonzentration

2.2 Spezifische Umweltqualitätsnorm (UQN)

Schutzgut	UQN	Anmerkung
Aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser)	JD-UQN: --- ZHK-UQN: ---	Unzureichende Datenbasis (siehe 8.1)
Aquatische Lebensgemeinschaften (Küsten- und Übergangsgewässer)	JD-UQN: --- ZHK-UQN: ---	Unzureichende Datenbasis (siehe 8.1)
Benthische Lebensgemeinschaften	UQN _{sediment} : ---	Nicht relevant (siehe 6.2)
Secondary poisoning	UQN _{biota.Top Predators} : ---	Nicht relevant (siehe 6.3)
Fischkonsum	UQN _{biota.Human} : ---	Nicht relevant (siehe 7)
Trinkwasserversorgung	UQN _{dw} : ---	Nicht relevant (siehe 7)

3 Allgemeine Stoffinformationen

3.1 Klassifikation und Kennzeichnung

R-Satz und Kennzeichnung / GHS	Quelle
---	N-CLASS Database [1]
---	http://www.ghs-konverter.de

3.2 Verfügbare Qualitätsanforderungen für Oberflächengewässer

Land	Status	Schutzgut	Bezeichnung	Wert	Bemerkung	Quelle
---	---	---	---	---		---

3.3 Wirkungsweise und Verwendung

Wirkweise: Hemmung der Cholesterinaufnahme [2]

Verwendung: β -Sitosterol ist ein Phytosterol, das im Pflanzenreich weit verbreitet ist (struktureller Bestandteil pflanzlicher Membranen). Lokale Einleitungen von β -Sitosterol in Gewässer erfolgen z.B. bei der Zellpapier- und Papierherstellung. β -Sitosterol wird als Arzneistoff eingesetzt [2].

Stoffrechtliche Regelungen:

WGK: 3 [3]

4 Physikalisch-chemische Stoffeigenschaften

Eigenschaft		Quelle
Wasserlöslichkeit	1,06E-05 mg/L (berechnet)	SPARC [4]
	4,63E-05 mg/L (berechnet)	EPISuite [5]
Dichte	0,97 g/cm ³ (berechnet)	SPARC [4]
Dampfdruck	10E-14,7 atm (berechnet)	SPARC [4]
Henry-Konstante	7,87E-08 atm/(mol/m ³) (berechnet)	SPARC [4]
	2,95E-04 atm/(mol/m ³) (berechnet)	EPISuite [5]

5 Verhalten und Verbleib in der Umwelt

Eigenschaft		Quelle
Biotischer und abiotischer Abbau		
Hydrolytische Stabilität (DT50)	---	
Photostabilität (DT50)	---	
Leicht biologisch abbaubar (ja/nein)	nein (berechnet)	EPISuite [5]
Metabolite	---	
Sorptionsverhalten		
log K_{ow}	9,12 (berechnet)	SPARC [4]
	9,65 (berechnet)	EPISuite [5]
	ca. 6 - 7 (Expertenschätzung)	Anmerkung: Die berechneten log K_{ow} Werte > 9 sind vermutlich Artefakte, ein log K_{ow} Wert von ca. 6 bis 7 (Expertenschätzung) erscheint realistischer.
K_{oc}	---	
K_d	---	
Bioakkumulation		
BCF (Bikonkonzentration)	671 (berechnet)	EPISuite [5]
BAF (Bioakkumulation)	287000 (berechnet)	EPISuite [5]
BMF (Biomagnifikation)	---	

6 Wirkungsdaten

6.1 Aquatische Organismen

Es liegen keine Testdaten im Sinne des Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [6] vor. Wirkungen auf Algen und Daphnien sind nicht beschrieben. Die verfügbaren umweltrelevanten Informationen betreffen ausschließlich endokrine Wirkungen auf Fische, insbesondere bei Einleitungen aus der Papier- und Zellstoffproduktion. Aus entsprechenden Arbeiten lässt sich entnehmen, dass Wirkungen bei Konzentrationen unterhalb von 12 $\mu\text{g/L}$ auftreten können [7]. Weil die Autoren der Studie nur höhere Konzentrationen (75 $\mu\text{g/L}$, 300 $\mu\text{g/L}$ und, 1200 $\mu\text{g/L}$, vermutlich oberhalb der Wasserlöslichkeit von β -Sitosterol) getestet und jeweils Effekte festgestellt haben, wird in der Publikation explizit kein LOEC-Wert angegeben. Dieser Wert unterstützt einen LOEC-Vorschlag von 10 $\mu\text{g/L}$ auf der Basis eines Literatur-Reviews [8].

6.2 Sedimentorganismen

Für β -Sitosterol liegen keine Testdaten zu Wirkungen auf Sedimentorganismen vor. Das Schutzgut „Sedimentorganismen“ ist für β -Sitosterol von nachrangiger Relevanz, obwohl der Triggerwert von log $K_{ow} \geq 3$ erreicht ist [6]. Die geringe Relevanz des Schutzgutes

„Sedimentorganismen“ ist in den hohen natürlichen β -Sitosterol-Konzentrationen im Sediment (Pflanzendebris) begründet.

6.3 Nahrungskette Fisch – Vogel oder Säugetier (Secondary poisoning)

Das Schutzgut „Anreicherung entlang von Nahrungsketten“ ist für β -Sitosterol nicht relevant, obwohl der Triggerwert von $\log K_{OW} \geq 3$ erreicht ist [6]. Die geringe Relevanz des Schutzgutes „Anreicherung entlang von Nahrungsketten“ ist in den hohen natürlichen β -Sitosterol-Konzentrationen in pflanzlichen Nahrungsbestandteilen begründet.

7 Wirkung auf die menschliche Gesundheit

Es liegen keine Angaben zur Humantoxizität von β -Sitosterol vor. Weil dieser Stoff in Dosen von mehr als 10 g/Tag zur Hemmung der Cholesterin-Aufnahme bei Störungen des Lipidstoffwechsels therapeutisch eingesetzt wird [9], ist bei umweltrelevanten Konzentrationen nicht mit toxischen Wirkungen zu rechnen.

8 Berechnung der Umweltqualitätsnormen

Es liegen keine ausreichenden Testdaten im Sinne des Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [6] vor, daher sollten die im folgenden abgeleiteten Werte nur für die weitere Prioritätensetzung verwendet werden.

8.1 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der aquatischen Organismen

Binnenoberflächengewässer (Flüsse und Seen): Bei der Ableitung der Jahresdurchschnitts-Umweltqualitätsnorm (JD-UQN) für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) sollten, bei Vorliegen genügender Daten, drei verschiedene Verfahren zum Einsatz kommen [6]:

1. Deterministisches Verfahren (Sicherheitsfaktor);
2. Probabilistisches Verfahren (SSD);
3. Feldstudien und Mesokosmen.

Die Datenlage erlaubt für β -Sitosterol nur die Anwendung der deterministischen Methode. Bei der Ableitung der JD-UQN gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [6] ist bei Vorliegen eines chronischen NOEC-/EC10-Werts für Fische oder Daphnien ein Sicherheitsfaktor von 100 anzuwenden. Eine Absenkung des Sicherheitsfaktors auf 10 ist möglich, wenn dieser Wert mit besonders sensiblen Spezies bestimmt wurde. Für β -Sitosterol liegt ein Datum zu endokrinen Wirkungen auf Fische vor. Erfahrungsgemäß ist dieser Endpunkt besonders empfindlich. Bei Verwendung des LOEC-Werts von 10 $\mu\text{g/L}$ für endokrine Wirkungen auf Fische und eines Sicherheitsfaktors von 20 (zusätzlich Faktor 2 für die Extrapolation von LOEC auf NOEC) ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) 0,5 $\mu\text{g/L}$ β -Sitosterol.

Weil keine Daten zur akuten aquatischen Toxizität von β -Sitosterol vorliegen, ist eine formale Ableitung eines ZHK-UQN-Vorschlags gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [6] nicht möglich. Im Hinblick auf Befunde, dass endokrine Wirkungen von β -Sitosterol sowohl von der Konzentration als auch der Zeitdauer der Exposition abhängen [7], erscheint kurzfristig eine zehnfach höhere Konzentration akzeptabel. Damit ergibt sich ein ZHK-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Süßwasser) von 5 $\mu\text{g/L}$ β -Sitosterol.

Weil die Datenbasis zu β -Sitosterol unzureichend ist, sollte der abgeleitete Wert nur für die weitere Prioritätensetzung verwendet werden.

Sonstige Oberflächengewässer (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer): Bei der Ableitung der Jahresdurchschnitts-Umweltqualitätsnorm (JD-UQN) für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) können ebenfalls die drei oben genannten Verfahren zum Einsatz kommen [6]. Weil keine Testdaten für marine Spezies bestimmt wurden, wurden die gleichen Daten wie zur Ableitung der UQN-Vorschläge für limnische Lebensgemeinschaften verwendet.

Bei der Ableitung der JD-UQN für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [6] ist aufgrund des Vorliegens eines chronischen LOEC-Werts ein Sicherheitsfaktor von 1000 auf diesen Wert anzuwenden. Eine Absenkung des Sicherheitsfaktors aufgrund besonders empfindlicher Endpunkte bei Vorliegen von nur einem Wert ist für den marinen Bereich nicht vorgesehen, wird aber in Analogie zu den Ausführungen für den limnischen Bereich empfohlen. Bei Verwendung des LOEC-Werts von 10 $\mu\text{g/L}$ für endokrine Wirkungen auf Fische und eines Sicherheitsfaktors von 200 (zusätzlich Faktor 2 für die Extrapolation von LOEC auf NOEC) ergibt die Berechnung des JD-UQN-Vorschlags für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) 0,05 $\mu\text{g/L}$ β -Sitosterol.

Weil keine Daten zur akuten aquatischen Toxizität von β -Sitosterol vorliegen, ist eine formale Ableitung eines ZHK-UQN-Vorschlags gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [6] nicht möglich. Im Hinblick auf Befunde, dass endokrine Wirkungen von β -Sitosterol sowohl von der Konzentration als auch der Zeitdauer der Exposition abhängen [7], erscheint, wie bei der Betrachtung für Binnenoberflächengewässer, kurzfristig eine zehnfach höhere Konzentration akzeptabel. Damit ergibt sich ein ZHK-UQN-Vorschlag für aquatische Lebensgemeinschaften (Salzwasser) von 0,5 $\mu\text{g/L}$ β -Sitosterol.

Weil die Datenbasis zu β -Sitosterol unzureichend ist, sollte der abgeleitete Wert nur für die weitere Prioritätensetzung verwendet werden.

8.2 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Sedimentorganismen

Nicht relevant (siehe 6.2)

8.3 Berechnung der Umweltqualitätsnorm zum Schutz von „fischfressenden“ Tierarten

Nicht relevant (siehe 6.3)

8.4 Berechnung der Umweltqualitätsnorm für den Fischkonsum

Nicht relevant (siehe 7)

8.5 Umweltqualitätsnorm zum Schutz der Trinkwasserversorgung und des Trinkwassers

Nicht relevant (siehe 7)

8.6 Schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm

Aufgrund der unzureichenden Datenlage können weder Vorschläge für spezifische Umweltqualitätsnormen, z.B. zum Schutz aquatischer Organismen in Binnenoberflächengewässern (Flüsse und Seen) und sonstigen Oberflächengewässern (Küsten-, Übergangs- und Hoheitsgewässer), noch schutzgutübergreifende Umweltqualitätsnorm gemäß Draft technical guidance for deriving environmental quality standards [6] empfohlen werden.

9. Literatur

- [1] Nordic Council of Ministers in collaboration with European Chemicals Bureau (2009). The N-CLASS Database 6.3. <http://apps.kemi.se/nclass/default.asp>.
- [2] Merck (1989). Merck Index. Merck & Co Inc, Rahway, NJ.
- [3] Sigma-Aldrich (2009). <http://www.sigmaaldrich.com>.
- [4] SPARC (2002). SPARC on-line calculator. <http://ibmlc2.chem.uga.edu/sparc/>.
- [5] U.S.EPA (2009). EPI Suite v4.0. <http://www.epa.gov/oppt/exposure/pubs/episuitedl.htm>. U.S.Environmental Protection Agency, Washington, DC.
- [6] Anonymus (2009). Chemicals and the water framework directive: Draft technical guidance for deriving environmental quality standards.
- [7] MacLatchy, D., Peters, L., Nickle, J., van der Kraak, G. (1997). Exposure to β -Sitosterol alters the endocrine status of goldfish differently than 17β -estradiol. Environ. Toxicol. Chem., 16, 1895-1904.
- [8] Billig, P., Gould, K. (2007). Technical Memorandum: Phytosterols in Bradwood Land- ing. SWCA Environmental Consultants, Portland, OR, USA.
- [9] Forth, W., Henschler, D., Rummel, W. (1980). Allgemeine und spezielle Pharmakologie und Toxikologie. B.I.-Wissenschaftsverlag, Mannheim/Wien/Zürich,